

DOCTORADO EN MATEMÁTICA APLICADA  
A LA INGENIERÍA Y A LAS CIENCIAS DE LA VIDA

TRABAJO DE D.E.A. 2005-06

Ondas discretas y aplicaciones al  
crecimiento de burbujas de helio  
en plutonio

Alumna: Bárbara Tapiador Fernández

Directora: Ana Carpio

# Índice

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1. Introducción.</b>                                    | <b>3</b>  |
| <b>2. Un modelo de cinética discreta.</b>                  | <b>4</b>  |
| 2.1. Figuras de la sección. . . . .                        | 7         |
| <b>3. Análisis asintótico.</b>                             | <b>10</b> |
| 3.1. Límite continuo y aproximación autosimilar. . . . .   | 11        |
| 3.2. Transformada de Laplace del sistema discreto. . . . . | 13        |
| 3.3. Figuras de la sección. . . . .                        | 18        |
| <b>4. Existencia y unicidad de soluciones.</b>             | <b>28</b> |
| 4.1. Existencia local . . . . .                            | 29        |
| 4.2. Positividad . . . . .                                 | 31        |
| 4.3. Existencia global . . . . .                           | 33        |
| 4.4. Propiedades de los núcleos $R_k$ . . . . .            | 34        |
| <b>5. Tratamiento numérico.</b>                            | <b>34</b> |
| 5.1. Resultados teóricos. . . . .                          | 35        |
| 5.2. Esquemas numéricos. . . . .                           | 37        |
| <b>6. Conclusiones</b>                                     | <b>38</b> |
| <b>7. Referencias</b>                                      | <b>39</b> |

## 1. Introducción.

La agregación molecular irreversible consiste en la absorción, por parte de un compuesto formado por  $k$  monómeros, de un nuevo monómero, de forma que no es posible disminuir el tamaño por pérdidas de masa. Existen modelos cinéticos simples que representan este fenómeno y numerosas situaciones en las que ocurre: coagulación de coloides, fagocitosis de leucocitos y el crecimiento de burbujas de helio en aleaciones de plutonio, entre otras. El proceso de formación de burbujas se describe en [1]. Como resultado del alpha-decaimiento, hay una etapa de tránsito inicial en la cual la autoirradiación produce dislocaciones que tienden a saturarse aproximadamente en dos años. Las partículas alpha se convierten en átomos de helio que reposan sobre los huecos desocupados producidos durante el decaimiento. Si entendemos por monómero un átomo de helio y por  $k$ -compuesto una burbuja formada por  $k$  átomos, se observa que los átomos de helio se difunden en el medio hasta encontrar otro monómero al que se une formando un dímero o hasta encontrar un  $k$ -compuesto para formar una burbuja de  $k + 1$  átomos. Estos compuestos no pierden átomos debido a las altas fuerzas de atracción que existen entre ellos.

En este trabajo nos centraremos en este ejemplo, describiendo y estudiando algunos modelos simples planteados para este caso concreto de gran importancia medioambiental. La acumulación de burbujas de helio en los contenedores de residuos radioactivos (mayormente plutonio) desgasta las paredes de los contenedores y da lugar a vertidos radioactivos que contaminan el entorno de forma irreversible.

## 2. Un modelo de cinética discreta.

Un modelo cinético simple para representar este proceso es el propuesto por Schaldach y Wolfer en [1]. En este modelo se considera que la densidad inicial de átomos de helio es nula y que existe una fuente productora de los mismos que representaremos mediante una función  $g$ . Las ecuaciones que rigen dicho modelo consisten en:

$$\dot{\rho}_k = 4\pi D \rho_1 a_{k-1} \rho_{k-1} - 4\pi D \rho_1 a_k \rho_k, k \geq 3, \quad (1)$$

$$\dot{\rho}_2 = 8\pi D \rho_1^2 a_1 - 4\pi D \rho_1 \rho_2 a_2, \quad (2)$$

$$\rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k \rho_k = \int_0^t g(t') dt', \quad (3)$$

donde  $\dot{\rho}_k = \frac{d\rho_k}{dt}$ , siendo  $\rho_k$  la densidad de  $k$ -compuestos con radio crítico  $a_k$ , esto es, cuando el centro de un monómero y un  $k$ -compuesto distan menos de  $a_k$  el monómero es absorbido, formándose un  $k+1$ -compuesto.  $\rho_1$  representa el número de monómeros por unidad de volumen.  $D$  es el coeficiente de difusión, constante en este modelo. En las ecuaciones (1) y (2) se ve reflejada la tasa de creación de  $k$ -meros, mientras que la ecuación (3) indica que el número total de átomos de helio distribuidos entre los distintos tipos de burbuja es igual al número total de átomos creados por la fuente  $g$ . Además se postula que el radio crítico antes mencionado se comporta como  $a_k = a_1 k^{1/3}$  y se toma la función fuente como  $g(t) = 1$ . Si realizamos un cambio de variables para conseguir un sistema adimensional, como se hace en [2], el modelo (1), (2) y (3) queda:

$$\frac{dr_k}{dt} = (k-1)^{1/3} c r_{k-1} - k^{1/3} c r_k, k \geq 3, \quad (4)$$

$$\frac{dr_2}{dt} = 2c^2 - 2^{1/3} c r_2, \quad (5)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} k r_k, \quad (6)$$

con las condiciones iniciales:

$$c(0) = 0; r_k(0) = 0, k \geq 2. \quad (7)$$

La variable  $c$  mide la cantidad de monómeros. Resolviendo el problema numéricamente y representando en una gráfica las distribuciones adimensionales de burbujas de tamaño  $k$ ,  $r_k$ , frente a dicho tamaño obtenemos el resultado mostrado en la figura 1.

Como se puede observar el tamaño de las burbujas crece sin límite, mientras que las medidas experimentales indican la existencia de un tamaño máximo por debajo del cual crece el número de burbujas. Nos encontramos así con la necesidad de modificar ligeramente el modelo presentado, para ver reflejado en el nuevo esta observación experimental.

En el modelo anterior el coeficiente de difusión  $D$  era constante y en el proceso de adimensionalización desaparecía de las ecuaciones. Ahora consideraremos un coeficiente de difusión variable con el tamaño del compuesto, en concreto expondremos tres posibilidades distintas. La primera consiste en:

$$D(k) = (\arctan(K_c - k) + \frac{\pi}{2}) \frac{1}{\pi}, \quad (8)$$

donde  $K_c$  representará el tamaño crítico que pueden alcanzar las burbujas de helio. La segunda se trata de:

$$D(k) = (\tanh(K_c - k) + 1) \frac{1}{2}, \quad (9)$$

con  $K_c$  representando el tamaño crítico una vez más. La tercera es una función polinómica definida a trozos:

$$D(k) = \begin{cases} 1, & \text{si } k \leq M_1, \\ \frac{(k-M_2)^2(3M_1-M_2-2k)}{(M_1-M_2)^3}, & \text{si } M_1 \leq k \leq M_2, \\ 0, & \text{si } k \geq M_2, \end{cases} \quad (10)$$

donde  $M_1$  indica el tamaño a partir del cual el número de burbujas empieza a crecer y  $M_2$  el tamaño máximo que alcanzan.

Con cualquiera de estas modificaciones las ecuaciones (1), (2) y (3) se transforman en:

$$\dot{\rho}_k = 4\pi D(k-1)\rho_1 a_{k-1} \rho_{k-1} - 4\pi D(k)\rho_1 a_k \rho_k, k \geq 3, \quad (11)$$

$$\dot{\rho}_2 = 8\pi D(1)\rho_1^2 a_1 - 4\pi D(2)\rho_1 \rho_2 a_2, \quad (12)$$

$$\rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k r_k = \int_0^{\bar{t}} g(t') dt'. \quad (13)$$

Si adimensionalizamos las ecuaciones anteriores y hacemos el cambio  $s = \int_0^t c(t') dt'$  obtendremos:

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{1/3} D(k-1) r_{k-1} - k^{1/3} D(k) r_k, k \geq 3, \quad (14)$$

$$\frac{dr_2}{ds} = 2c D(1) - 2^{1/3} D(2) r_2, \quad (15)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} k r_k, \quad (16)$$

$$\frac{ds}{dt} = c. \quad (17)$$

con las condiciones iniciales:

$$c(0) = 0; r_k(0) = 0, k \geq 2. \quad (18)$$

El cambio de variable nos transforma el sistema no lineal de partida en un sistema lineal, pero con una singularidad en  $s = 0$ .

Podemos optar por resolver el sistema no lineal en función de la variable temporal  $t$  usando (17) para regresar a la variable  $t$  en (14)-(15), junto con la restricción (16) para calcular  $c$  en cada paso:

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{1/3}D(k-1)cr_{k-1} - k^{1/3}D(k)cr_k, k \geq 3, \quad (19)$$

$$\frac{dr_2}{ds} = 2c^2D(1) - 2^{1/3}D(2)cr_2, \quad (20)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} kr_k, \quad (21)$$

Obtenemos  $r_k(t)$  y  $c(t)$ . Conocida  $c(t)$ , (17) nos proporciona  $s(t)$ . Aunque las condiciones iniciales sean nulas, la solución es no nula debido a la presencia de un término fuente.

Si trabajamos con la variable  $s$ , invirtiendo (17) tenemos una ecuación para  $t(s)$  que arranca de una singularidad. Por otro lado, derivando en (16) respecto a  $s$  para eliminar la variable  $t$  de la ecuación, hallamos una ecuación para  $c(s)$ :

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2D(1) + cM_{\frac{1}{3}} = 1, \quad (22)$$

con

$$M_{\mu} = \sum_{k=2}^{\infty} k^{\mu}D(k)r_k. \quad (23)$$

El sistema a resolver cuando se trabaja con la variable  $s$  viene dado por (14)-(15), junto con (25) y (17). Obtenemos  $r_k(s)$ ,  $c(s)$  y  $t(s)$ . El sistema en la variable  $t$  puede tener carácter rígido al trabajar con la restricción (21), por lo que su resolución numérica puede ser más sencilla reemplazando esta restricción por la ecuación diferencial para  $c$ :

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2D(1) + cM_{\frac{1}{3}} = 1. \quad (24)$$

Integrando (14)-(15) respecto a  $k$  y sumando obtenemos:

$$\frac{dM_0}{ds} = 2cD(1). \quad (25)$$

Integrando (16) respecto a  $k$ , derivando el resultado respecto a  $s$  y usando (22), resulta además que

$$\frac{dM_1}{ds} = 4cD(1) + M_{\frac{1}{3}}. \quad (26)$$

La alternancia entre las variables  $t$  y  $s$  será útil en la siguiente sección. Los resultados numéricos que mostramos en esta sección usan la variable temporal  $t$ , si bien nos limitamos a ilustrar la distribución de tamaños en  $k$  a tiempos fijos.

Al resolver numéricamente las ecuaciones anteriores eligiendo como función  $D$  la definida en (8) obtenemos la gráfica mostrada en la figura 3. Podemos observar que el número de las burbujas va aumentando conforme el tamaño se aproxima a un valor crítico de  $k$ , pero no parece que la distribución de tamaños se estanque en un valor máximo. Las otras dos expresiones sugeridas para  $D$  sí que dan lugar a tamaños máximos.

Al resolver numéricamente las ecuaciones (11), (12), (13) usando la expresión (9) de  $D$  observamos un tamaño crítico para  $k$  que las burbujas no rebasan. Por debajo de dicho tamaño, aumenta continuamente el número de burbujas con  $k$  átomos, véase la figura 4. Esta misma observación podemos hacerla si representamos la solución obtenida usando para  $D$  la expresión (10), como se ve en la figura 5. De esta manera, los nuevos modelos dados por (11), (12) y (13) se ajustan más a las observaciones experimentales, en especial, el segundo y el tercero.

Por último, en la figura 6, comparamos la concentración de monómeros  $c$  usando las distintas definiciones del coeficiente de difusión.

## 2.1. Figuras de la sección.

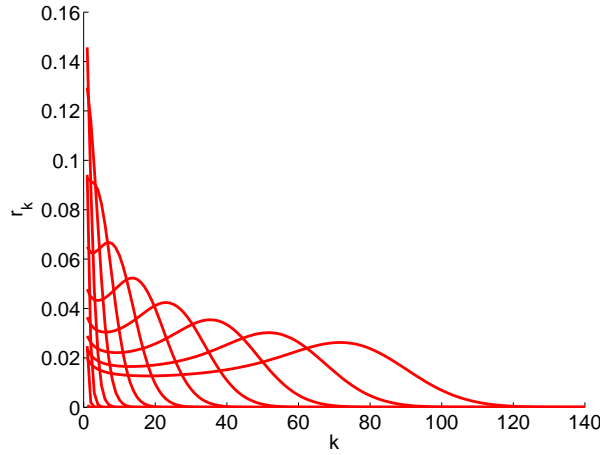


Figura 1: Funciones de distribución  $r_k$ , frente al tamaño de las burbujas  $k$ , con coeficiente de difusión constante.

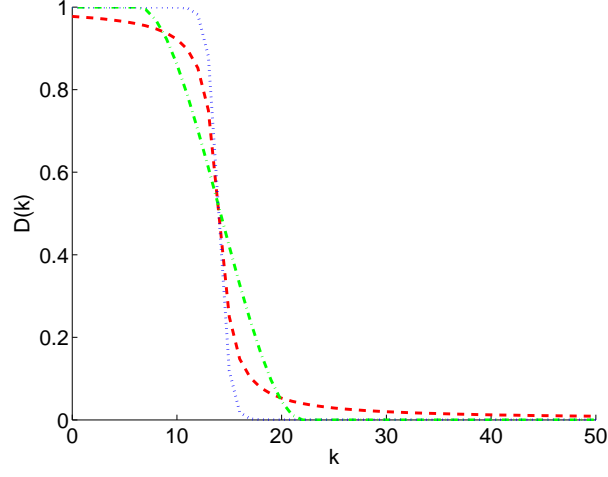


Figura 2: Comparación de los tres coeficientes de difusión variables en estudio:  $D(k) = \arctan((K_c - k) + \frac{\pi}{2}) \frac{1}{\pi}$  (línea discontinua),  $D(k) = (\tanh(K_c - k) + 1) \frac{1}{2}$  (línea punteada),  $D(k)$  polinómica (línea de punto-guión).

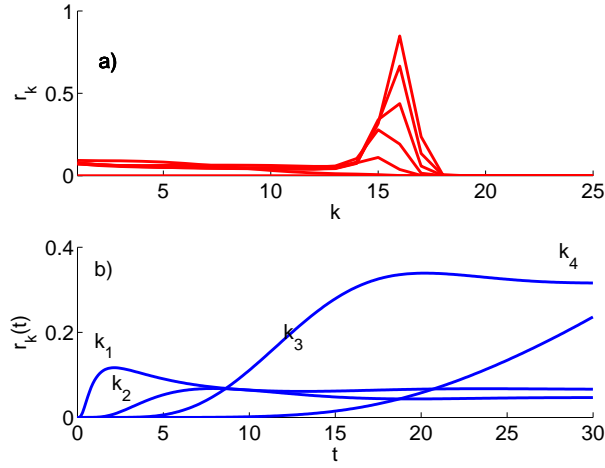


Figura 3: a):Funciones de distribución  $r_k$ , frente al tamaño de las burbujas  $k$ , con coeficiente de difusión (8). b):Funciones de distribución  $r_k(t)$  frente al tiempo  $t$ , para  $k_1 = 2$ ,  $k_2 = 8$ ,  $k_3 = 15$ ,  $k_4 = 17$  y con coeficiente de difusión (8).



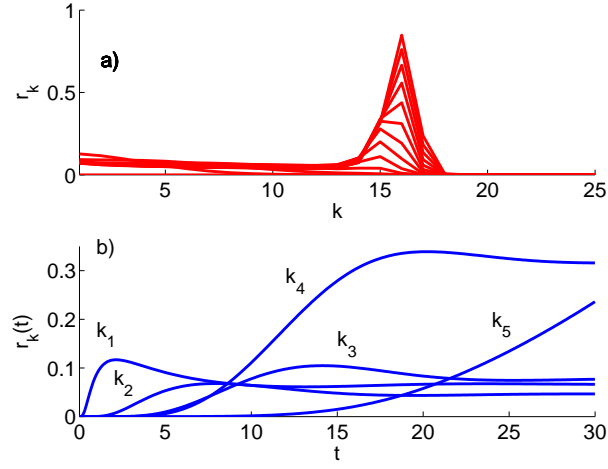


Figura 4: a): Funciones de distribución  $r_k$ , frente al tamaño de las burbujas  $k$ , con coeficiente de difusión (9). b): Funciones de distribución  $r_k(t)$  frente al tiempo  $t$ , para  $k_1 = 2$ ,  $k_2 = 8$ ,  $k_3 = 14$ ,  $k_4 = 15$ ,  $k_5 = 17$ , y con coeficiente de difusión (9).

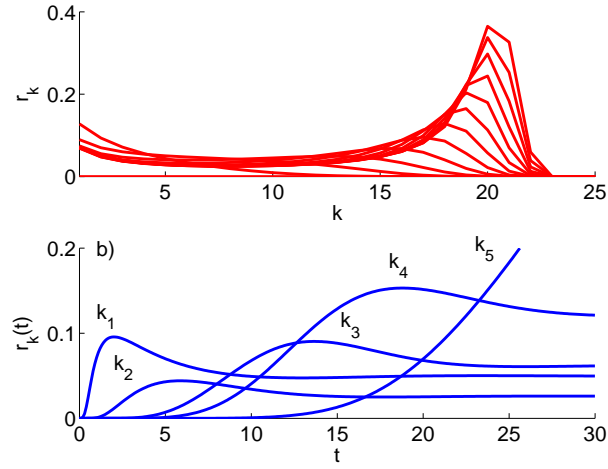


Figura 5: a): Funciones de distribución  $r_k$ , frente al tamaño de las burbujas  $k$ , con coeficiente de difusión (10). b): Funciones de distribución  $r_k(t)$  frente al tiempo  $t$ , para  $k_1 = 2$ ,  $k_2 = 8$ ,  $k_3 = 16$ ,  $k_4 = 18$ ,  $k_5 = 21$  y con coeficiente de difusión (10).

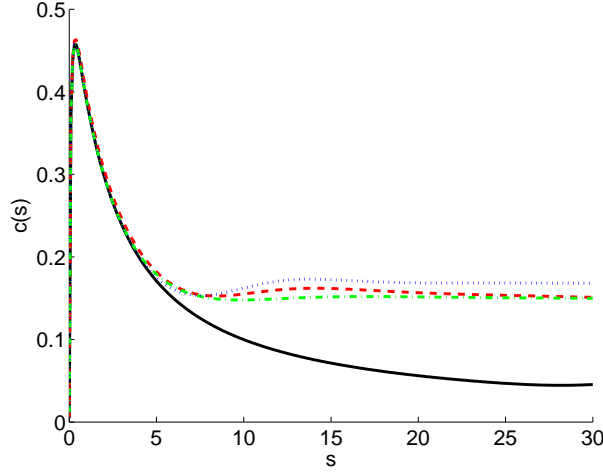


Figura 6: Concentración de monómeros, con  $D$  constante (línea continua), con  $D$  de la forma (8) (línea discontinua), con  $D$  definido por (9) (línea punteada) y con  $D$  como en (10) (línea de punto-guión).

### 3. Análisis asintótico.

Pretendemos, ahora, obtener una solución explícita aproximada de las ecuaciones (14), (15), (16) y (17). Para ello consideraremos sucesivamente estrategias diversas.

En primer lugar, analizamos el límite continuo cuando  $k \rightarrow 0$ , que nos proporciona una ecuación en derivadas parciales de tipo ley de conservación para la distribución  $r(k, s)$  complementada con una restricción integral que incorpora la fuente  $g(t) = 1$  y una condición de contorno en términos de  $c$ . Las aproximaciones obtenidas a partir de este límite continuo se construyen a partir de soluciones autosimilares aproximadas que explotan en sus extremos y resultan ser bastante pobres. Esto indica que se debieran incorporar derivadas de orden superior en la aproximación pero la ecuación resultante carece entonces de soluciones con una expresión analítica sencilla, con lo cual se ha de resolver numéricamente y no se gana nada respecto al modelo discreto.

Retornamos al modelo discreto y observamos que, tomando la transformada de Laplace respecto a la variable  $s$ , conseguimos expresar las distribuciones de tamaños  $r_k(s), k \geq 2$  como convolución de la distribución de monómeros  $r_1(s) = c(s)$ . Los núcleos de convolución dependen de  $k$  y se calculan invirtiendo la transformada de Laplace de funciones con una expresión analítica conocida. La estructura de esos núcleos permite aproximarlos por deltas de Dirac centradas en torno a su media. A partir de ahí, conseguimos desacoplar el sistema discreto y obtener una ecuación integrodiferencial para la evolución de la población de monómeros, con lo que se cierra la aproximación.

### 3.1. Límite continuo y aproximación autosimilar.

Suponemos que  $r_k(s) = r(k, s)$  es función de una variable continua  $s$  y otra variable continua  $k$ . Haciendo un desarrollo de Taylor de primer orden en la variable  $k$ , aproximamos (14) por

$$\frac{\partial r}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial k}(k^{\frac{1}{3}} D(k) r) = 0, \quad (27)$$

cometiendo un error de orden  $\frac{\partial^2}{\partial^2 k}(k^{\frac{1}{3}} D(k) r)$ . La ecuación (16) se transforma en

$$\int_0^\infty k r(k, s) dk = t, \quad (28)$$

englobando la variable  $c = r_1$ , que reaparece individualmente en forma de condición de contorno. Integrando (27) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial s} \int_0^\infty r(k, s) dk = \lim_{k \rightarrow 0} (k^{\frac{1}{3}} D(k) r)$$

ya que  $D$  y  $r$  se anulan para  $k$  grande. Usando la versión continua de (25) la condición de contorno resulta ser

$$\lim_{k \rightarrow 0} (k^{\frac{1}{3}} D(k) r) = 2D(1)c. \quad (29)$$

Una vez determinado el problema continuo, estudiamos la estructura de sus soluciones. Multiplicando (27) por  $k^{\frac{1}{3}} D(k)$  tenemos

$$\frac{\partial(k^{\frac{1}{3}} D(k) r)}{\partial s} + k^{\frac{1}{3}} D(k) \frac{\partial}{\partial k}(k^{\frac{1}{3}} D(k) r) = \frac{\partial v}{\partial s} + k^{\frac{1}{3}} D(k) \frac{\partial v}{\partial k} = 0,$$

siendo  $v = k^{\frac{1}{3}} D(k) r$ . El método de las características nos dice que  $v(k, s)$  es constante a lo largo de las curvas características  $s - a(k)$ , con

$$\frac{da}{dk} = \frac{1}{k^{1/3} D(k)}.$$

Por tanto,  $v(k, s) = v(s - a(k))$  y las soluciones de (27) tienen la forma

$$r(k, s) = \frac{v(s - a(k))}{k^{1/3} D(k)}.$$

La condición de contorno (29), nos dice que  $v(0, s) = v(s - a(0)) = 2D(1)c(s)$ . Podemos tomar  $a(0) = 0$  y  $v(s) = 2D(1)c(s)$ , con lo que

$$r(k, s) = \frac{2D(1)c(s - a(k))}{k^{1/3} D(k)}.$$

Como  $c$  sólo está definido para  $s > 0$ , conviene introducir una función de Heaviside  $\theta$  que trunque esta expresión si  $s < a(k)$ . Las soluciones de (27)-(29) son pues de la forma:

$$r(k, s) = \frac{2D(1)c(s - a(k))\theta(s - a(k))}{k^{\frac{1}{3}} D(k)}, \quad (30)$$

con

$$a(k) = \int_0^k \frac{d\tilde{k}}{\tilde{k}^{\frac{1}{3}} D(\tilde{k})}, \quad (31)$$

y  $\theta(x) = 1$  si  $x > 0$  y  $\theta(x) = 0$  si  $x < 0$ . Para conocer completamente la solución hemos de hallar  $c$  tal que  $c(0) = 0$  a partir de la restricción integral usando (30). Con el cambio de variable  $s' = s - a(k)$ ,  $ds' = \frac{dk}{k^{\frac{1}{3}} D(k)}$  y  $k = a^{-1}(s - s')$

$$t = \int_0^\infty kr(k, s)dk = 2D(1) \int_0^s a^{-1}(s - s')c(s')ds',$$

o, equivalentemente, si derivamos respecto a  $s$

$$1 = 2D(1)c(s) \int_0^s (a^{-1}(s - s'))^{1/3} D(a^{-1}(s - s'))c(s')ds'.$$

Nótese que  $a^{-1}$  se puede calcular resolviendo la ecuación

$$\frac{da^{-1}(k)}{dk} = \frac{1}{\frac{da}{dk}(a^{-1}(k))} = (a^{-1}(k))^{1/3} D(a^{-1}(k))$$

partiendo de  $a^{-1}(0) = 0$ . Esta fórmula es poco práctica por la compleja expresión de  $a$ . Sólo cuando  $D(k) = D$  es constante se simplifica y permite calcular  $c$ , ya que  $a(k) = \frac{3}{2D}k^{2/3}$  y  $a^{-1}(k) = (\frac{2D}{3})k^{3/2}$ .

En la figura 7 podemos comparar la evolución de las funciones  $a(k)$  en cada caso. Para ello hemos usado una aproximación numérica de cuarto orden con el fin de calcular las integrales correspondientes. Para el comportamiento del modelo es muy importante el de la función  $a(k)$  asociada. Como vemos, en el caso  $D$  polinómica  $a(k)$  explota en tiempo finito ya que el denominador se anula en tiempo finito. Cuando  $D$  se genera con una tangente hiperbólica, no hay explosión en tiempo finito, ya que el denominador no se anula. No obstante alcanza valores grandes rápido y se alcanza el infinito numérico en tiempo finito y breve. En el caso de la arcotangente, el crecimiento es más suave. El crecimiento rápido de  $a$  se corresponde con distribuciones que parecen estancarse en un tamaño máximo. El crecimiento lento da lugar a distribuciones en las cuales el tamaño de las burbujas crece sin cesar.

Las soluciones que hemos obtenido para el problema continuo no son del todo explícitas pues  $c$  no lo es. Nos preguntamos si se puede hallar alguna solución particular relevante. Observamos que si  $D$  es constante, es posible hallar una solución autosimilar,

$$r(k, s) = \frac{R_0 D^{-1/2}}{k^{1/3}(s - \frac{3}{2}k^{2/3})^{3/4}} \theta(s - \frac{3}{2}k^{2/3}) = \frac{R_0 s^{-5/4} \xi^{-1/3}}{(1 - \frac{3}{2}\xi^{2/3})^{3/4}} \quad (32)$$

$$c(s) = \frac{1}{2} R_0 D^{-1/2} s^{-3/4} \quad (33)$$

$$s = (\frac{7}{8} R_0 D^{-1/2} t)^{4/7} \quad (34)$$

aunque no se cumple la restricción  $c(0) = 0$ . Las variables de similaridad que dejan invariante (27) son  $\xi = ks^{-3/2}$  y  $\rho = s^{5/4}r$ . La expresión para  $c$  sale de  $r(\xi, s)$  y la condición de contorno (29), mientras que  $R_0$  se determina a partir de la restricción integral:  $R_0 = \frac{(27\pi)^{\frac{1}{4}}}{\Gamma(\frac{1}{4})} \approx 0,837042$ . Esta solución tiene dos singularidades integrables, en 0 y en  $s = \frac{3}{2}k^{2/3}$ , para cada  $s$  fijo.

Cuando  $D$  no es constante, esto no es posible, ya que no hay reescalamientos que dejen invariante (27). En nuestro caso,  $D$  es aproximadamente constante en una región, lo cual sugiere expresiones aproximadas para las soluciones, contruídas modificando la solución autosimilar. Basta utilizar (33)-(34) en conjunción con (30)-(31). La diferencia reside en que usamos el  $a(k)$  correspondiente a  $D$  variable.

En las figuras 8, 9 y 10, podemos comparar la solución numérica del problema discreto inicial con la solución aproximada del problema continuo, en cada uno de los tres casos. En todos ellos las soluciones aproximadas explotan cerca de los tamaños en los que las soluciones numéricas se hacen cero. En los casos en los que el coeficiente de difusión es polinómico o tangente hiperbólica, el hecho anterior describe en cierto modo el comportamiento asintótico de las soluciones, hay un tamaño máximo que se alcanza a partir de cierto instante y el número de burbujas de dicho tamaño aumenta a medida que lo hace el tiempo. En el caso de la arcotangente o la difusión constante esto no sucede por lo que la singularidad carece de sentido alguno.

En todo caso, el perfil de  $c$  que estamos usando no parece aceptable debido a sus singularidades y es preciso buscar otras aproximaciones que reproduzcan  $c$  de forma aceptable.

### 3.2. Transformada de Laplace del sistema discreto.

Dado que no es posible resolver de forma exacta el problema continuo y que en cualquier caso hemos de buscar aproximaciones que ensamblen soluciones en las tres regiones de  $D$  (etapa inicial constante, transición, zona nula), trataremos de solucionar de manera exacta las ecuaciones discretas (14), (15):

$$\frac{dr_2}{ds} = 2cD(1) - 2^{1/3}D(2)r_2,$$

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{1/3}D(k-1)r_{k-1} - k^{1/3}D(k)r_k, k \geq 3.$$

Si tomamos transformadas de Laplace en estas ecuaciones nos queda:

$$\hat{r}_2(\sigma) = \frac{2D(1)}{\sigma + 2^{\frac{1}{3}}D(2)}\hat{c}, \quad (35)$$

$$\hat{r}_k(\sigma) = \frac{(k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)}{\sigma + k^{\frac{1}{3}}D(k)}\hat{r}_{k-1}, \quad k \geq 3. \quad (36)$$

De aquí obtenemos:

$$2^{\frac{1}{3}} D(2) \hat{r}_2(\sigma) = \frac{2D(1)}{1 + \sigma 2^{\frac{-1}{3}} D(2)^{-1}} \hat{c}, \quad (37)$$

$$k^{\frac{1}{3}} D(k) \hat{r}_k(\sigma) = \frac{(k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1)}{1 + \sigma k^{\frac{-1}{3}} D(k)^{-1}} \hat{r}_{k-1}, \quad k \geq 3. \quad (38)$$

Iterando podemos expresar las transformadas de Laplace mediante la fórmula:

$$k^{\frac{1}{3}} D(k) \hat{r}_k = 2\hat{c} D(1) \hat{R}_k, \quad (39)$$

donde

$$\hat{R}_k(\sigma) = \prod_{j=2}^k \frac{1}{1 + \sigma j^{\frac{-1}{3}} D(j)^{-1}}. \quad (40)$$

Usando la fórmula de la transformada de Laplace inversa:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s_1 - i\infty}^{s_1 + i\infty} e^{st} \hat{f}(s) ds,$$

en (39), podemos expresar las soluciones  $r_k$  en función de las  $R_k$  (transformadas inversas de  $\hat{R}_k$ ), quedando:

$$r_k = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}} D(k)} c * R_k, \quad k \geq 3,$$

de donde deducimos:

$$r_k(s) = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}} D(k)} \int_0^s R_k(s-s') c(s') ds', \quad k \geq 2 \quad (41)$$

con

$$R_k(t) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{-iL}^{iL} e^{st} \hat{R}_k(s) ds = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-L}^L e^{its} \hat{R}_k(is) ds. \quad (42)$$

Podemos calcular numéricamente, tanto las funciones  $R_k$ , como las integrales necesarias para conseguir el valor de  $r_k$ , las soluciones de nuestro problema. En las figuras 11, 12 y 13 comparamos los resultados obtenidos al calcular las soluciones del sistema original con las predichas por la fórmula (41), para cada una de las definiciones del coeficiente de difusión  $D(k)$ . En todas ellas se han usado los valores de  $c(s)$  obtenidos resolviendo el sistema discreto. Se observa una excelente aproximación. Vamos a obtener ahora una ecuación desacoplada para  $c$  que nos evite resolver el sistema discreto.

Insertando en la definición de  $M_{\frac{1}{3}}$  la fórmula (41) y sustituyendo en (22) obtenemos la siguiente ecuación integrodiferencial para la concentración de monómeros  $c$ , que debe ser resuelta usando la condición inicial  $c(0) = 0$ :

$$c \frac{dc}{ds} + 4D(1)c^2 + 2D(1)c \int_0^s \left[ \sum_{k=2}^{\infty} R_k(s-s') \right] c(s') ds' = 1. \quad (43)$$

Las fórmulas (41) junto con la ecuación (43) nos dan una reformulación exacta del sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas (14)-(15) y (22). La ecuación integrodiferencial para  $c$  es exacta pero muy costosa de resolver, pues el núcleo integral lo forma una serie infinita de inversas de Laplace de (40) que han de calcularse numéricamente. Podemos obtener ecuaciones aproximadas menos costosas proponiendo expresiones aproximadas para los núcleos  $R_k$ .

En los tres casos de coeficiente de difusión variable las figuras 18, 19 y 20 indican que las funciones  $R_k$  tiene simplemente forma de función delta centrada en torno a su media  $a(k)$ . Por tanto,  $r_k$  será:

$$r_k(s) = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)} \int_0^s \delta(s-s'-a(k))c(s')ds' = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)} c(s-a(k))\theta(s-a(k)). \quad (44)$$

Nótese que esta es exactamente la estructura que habíamos propuesto para las distribuciones  $r(k, s)$  en la Sección 3.1 usando el método de características. Vamos a calcular una aproximación de  $c$  mucho mejor que la propuesta en esa sección. Combinada con expresión exacta (41) que hemos obtenido para las distribuciones  $r_k$  da una buena aproximación a la solución del sistema de partida. Combinada con (44), la aproximación de las funciones  $r_k(t)$  no es muy buena pues está descentrada. La aproximación mejora corrigiendo la aproximación propuesta para los núcleos. Se puede proponer por ejemplo núcleos con estructura de gaussiana.

Comencemos por obtener la ecuación aproximada para  $c$  con núcleos tipo delta. Introduciendo la expresión de  $r_k$  en la fórmula (22) tenemos:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 D(1) + 2D(1)c \sum_{k=2}^{\infty} c(s-a(k)) = 1$$

Aproximamos la suma por una integral y efectuamos de nuevo el cambio de variable  $s' = s - a(k)$ ,  $k = a^{-1}(s - s')$ ,  $dk = -(a^{-1})'(s - s')ds'$

$$\int_{0 < a(k) < s} c(s-a(k))dk = \int_0^s (a^{-1})'(s-s')c(s')ds'.$$

Como  $(a^{-1})' = (a^{-1})^{1/3}D(a^{-1})$  deducimos que la concentración de monómeros debe satisfacer la siguiente ecuación integro-diferencial:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 D(1) + 2D(1)c \int_0^s (a^{-1}(s-s'))^{1/3} D(a^{-1}(s-s'))c(s')ds' = 1 \quad (45)$$

y escribiéndolo en la variable  $t$ , llegamos a las ecuaciones:

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 D(1) + 2D(1)c \int_0^t (a^{-1}(s(t)-s(t')))^{1/3} D(a^{-1}(s(t)-s(t')))[c(t')]^2 dt' = 1, \quad (46)$$

$$\frac{ds}{dt} = c. \quad (47)$$

Las figuras 14, 15 y 16 comparan los valores de  $c(s)$  obtenidos a partir del sistema discreto y de la aproximación (45) para los distintos coeficientes de difusión. Los perfiles de  $r_k(s)$  se aproximan por (44). Se obtienen mejores perfiles con mejores aproximaciones de  $R_k$ .

Como hemos observado la aproximación de las funciones  $R_k$  por medio de deltas nos proporciona una buena aproximación de la concentración de monómeros  $c$ , sin embargo no podemos decir lo mismo de la aproximación de las soluciones  $r_k$ . Es por ello, que proponemos una expresión de las  $R_k$  por medio de gaussianas, la cual ofrece un mejor resultado para las  $r_k$  como podemos ver en las figuras 24, 25 y 26.

La gaussiana utilizada depende del coeficiente de difusión y tratamos que se ajuste lo más posible a las  $R_k$ , en especial para valores de  $k$  grandes (alrededor de 20), pues estos son los tamaños próximos al tamaño límite del modelo, el número de burbujas de dichos tamaños empieza a crecer. Se trata de funciones de la forma:

$$R(k, s) = \frac{e^{-\frac{(\beta s - e(k))^2}{4\alpha(k)k}}}{(4\pi\alpha(k)k)^{\frac{1}{2}}}$$

donde,  $\beta = \frac{1}{6}$ . En el caso de coeficiente de difusión (8) tomamos:

$$e(k) = -0,00028a(k)^2 + 0,187356a(k) - 0,754826,$$

$$\alpha(k) = 0,002075k^2 - 0,06215k + 0,466775,$$

cuando  $D$  viene expresado por (9) las funciones  $e$  y  $\alpha$  consisten en:

$$e(k) = 0,007912a(k)^2 + 0,065709a(k) - 0,034617,$$

$$\alpha(k) = 0,000643k^2 - 0,015428k + 0,090586$$

y, por último, para  $D$  como en (10) debemos tomar:

$$e(k) = 0,001649a(k)^2 + 0,102867a(k) + 0,278822,$$

$$\alpha(k) = 0,0088k^2 - 0,3365k + 3,2254.$$

En las figuras 21, 22 y 23 podemos apreciar que efectivamente estas gaussianas se ajustan bien a las  $R_k$  calculadas anteriormente.

En el caso  $D$  constante, la figura 17 parece sugerir que existen ciertos valores  $S_k$  de manera que las funciones  $R_k$  tienen forma de delta hasta dicho valor y son constantes a partir de él, es decir, son funciones continuas de la forma:

$$R_k(s) = \begin{cases} \delta(s - a(k)), & \text{si } s \leq S_k, \\ C_k, & \text{si } s > S_k. \end{cases} \quad (48)$$

Utilizando esta expresión para  $R_k$  podemos expresar  $r_k$  como:

$$r_k(s) = \begin{cases} \frac{2}{k^{\frac{1}{3}}} \int_0^s \delta(s - s' - a(k))c(s')ds', & \text{si } s \leq S_k, \\ \frac{2}{k^{\frac{1}{3}}} [\int_0^{S_k} \delta(s - s' - a(k))c(s')ds' + C_k \int_{S_k}^s c(s')ds'], & \text{si } s > S_k \end{cases} \quad (49)$$



En el caso en que  $s \leq S_k$ , sustituyendo (49) en (22) obtenemos:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 + 2c \sum_{k=2}^{\infty} \int_0^s \delta(s - s' - a(k)) c(s') ds' = 1. \quad (50)$$

Procediendo análogamente a como se hace en [2] podemos aproximar  $a(k)$  de la siguiente forma:

$$a(k) = \sum_{j=2}^k j^{-\frac{1}{3}} \sim \frac{3}{2} k^{\frac{2}{3}} - 3. \quad (51)$$

Usamos, ahora, esta expresión de  $a$  en el cálculo de la integral que aparece en (50). Haciendo el cambio de variable  $s' = s - a(k)$  y escribiendo todo en función de la variable  $t$  encontramos una ecuación integro-diferencial para la concentración de monómeros  $c$ :

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 + 2\sqrt{\frac{2}{3}} c \int_0^t (s(t) - s(t') + 3)^{\frac{1}{2}} [c(s(t'))]^2 dt' = 1 \quad (52)$$

Para el caso en que  $s > S_k$ , operando de la misma manera pero con la expresión correspondiente en (49) concluimos que se cumple:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 + 2c \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^{S_k} (s - s' + 3)^{\frac{1}{2}} c(s') ds' + C_k \int_{S_k}^s c(s') ds' \right] = 1,$$

en función de  $t$ :

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 + 2c \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^{T_k} (s(t) - s(t') + 3)^{\frac{1}{2}} [c(s(t'))]^2 dt' + C_k \int_{T_k}^t [c(s(t'))]^2 dt' \right] = 1, \quad (53)$$

donde  $T_k$  cumple que  $s(T_k) = S_k$ .

### 3.3. Figuras de la sección.

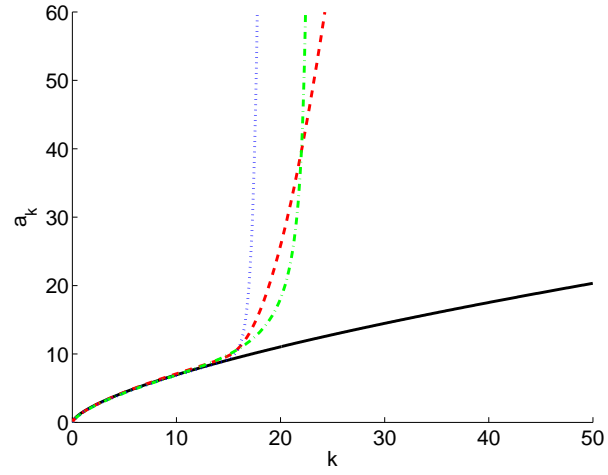


Figura 7: Funciones  $a_k$ , frente al tamaño de las burbujas  $k$ , para el modelo (1), (2), (3) (línea continua); para el modelo (11), (12), (13) con coeficiente de difusión (8) (línea discontinua), con coeficiente de difusión (9) (línea punteada) y con coeficiente de difusión (10) (línea de punto-guión).

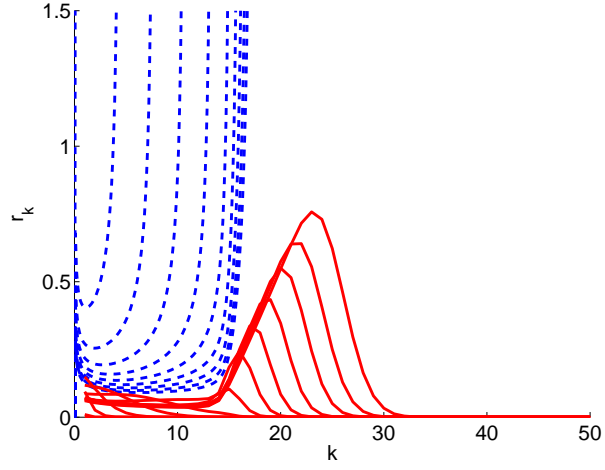


Figura 8: Funciones de distribución  $r_k$  obtenidas a partir del modelo discreto (línea continua) y soluciones del modelo continuo (línea discontinua), con coeficiente de difusión (8).

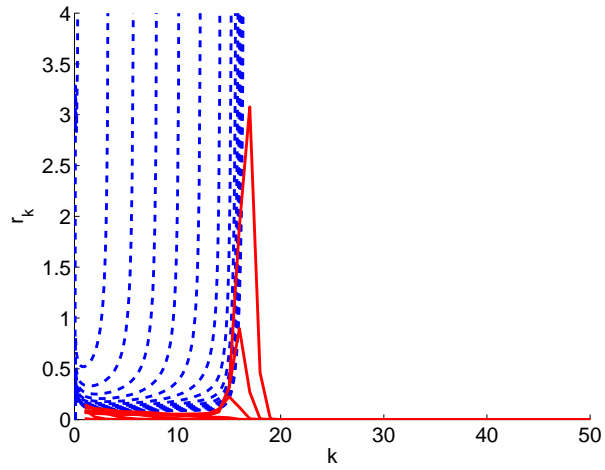


Figura 9: Funciones de distribución  $r_k$  obtenidas a partir del modelo discreto (línea continua) y soluciones del modelo continuo (línea discontinua), con coeficiente de difusión (9).

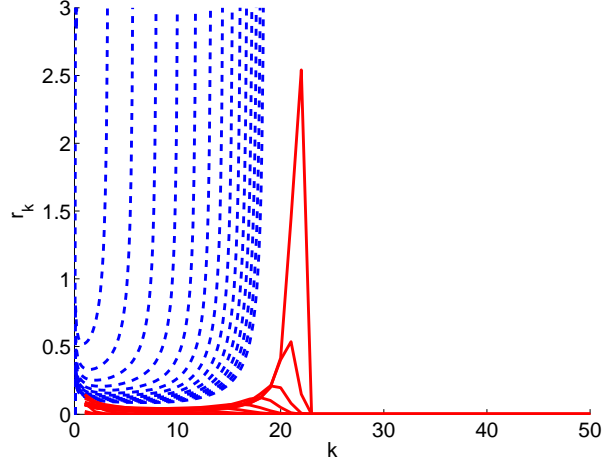


Figura 10: Funciones de distribución  $r_k$  obtenidas a partir del modelo discreto (línea continua) y soluciones del modelo continuo (línea discontinua), con coeficiente de difusión (10).

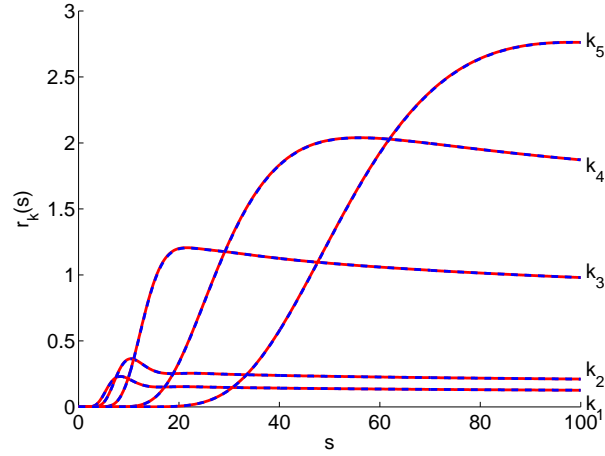


Figura 11: Funciones  $r_k(s)$ , para  $k_1 = 12$ ,  $k_2 = 15$ ,  $k_3 = 18$ ,  $k_4 = 21$  y  $k_5 = 24$ , obtenidas a partir del problema inicial (línea continua) y soluciones predichas por (41) (línea discontinua), con coeficiente de difusión (8).

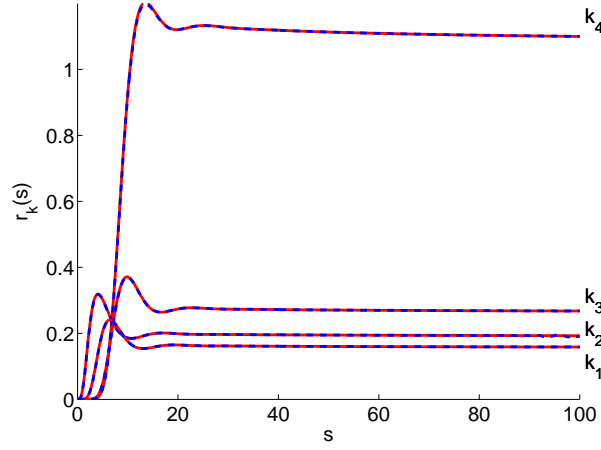


Figura 12: Funciones  $r_k(s)$ , para  $k_1 = 5$ ,  $k_2 = 9$ ,  $k_3 = 15$ ,  $k_4 = 16$  obtenidas a partir del problema inicial (línea continua) y soluciones predichas por (41) (línea discontinua), con coeficiente de difusión (9).

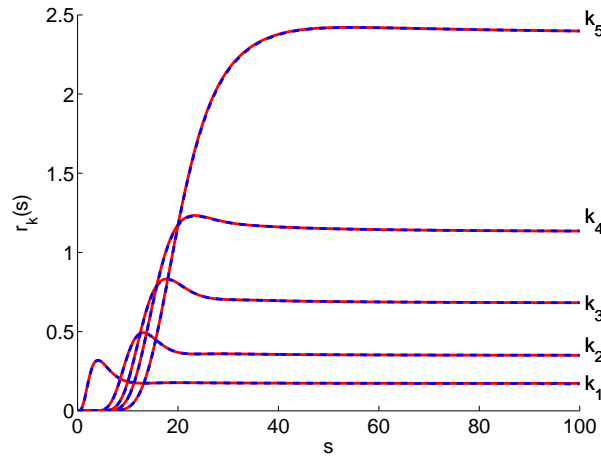


Figura 13: Funciones  $r_k(s)$ , para algunos  $k$  fijos, obtenidas a partir del problema inicial (línea continua) y soluciones predichas por (41) (línea discontinua), para  $k_1 = 5$ ,  $k_2 = 17$ ,  $k_3 = 19$ ,  $k_4 = 20$ ,  $k_5 = 21$  y con coeficiente de difusión (10).

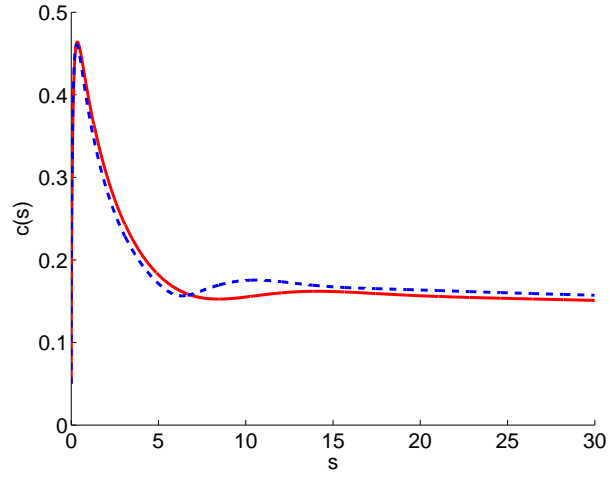


Figura 14:  $c$  calculada numéricamente a partir del sistema discreto (línea continua) y a partir de la ecuación (43) (línea discontinua). Usamos coeficiente de difusión (8).

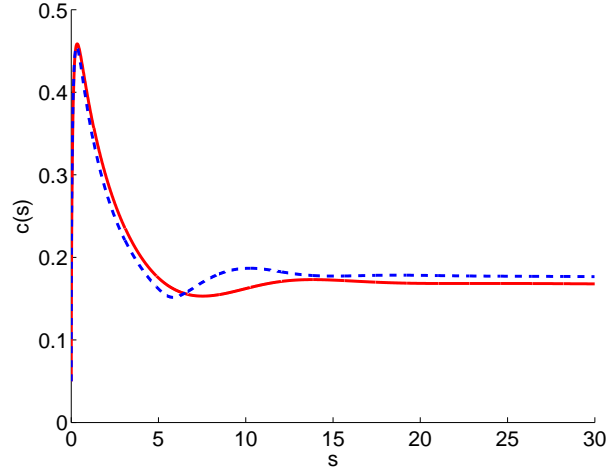


Figura 15:  $c$  calculada numéricamente a partir del sistema discreto (línea continua) y a partir de la ecuación (43) (línea discontinua). Usamos coeficiente de difusión (9).

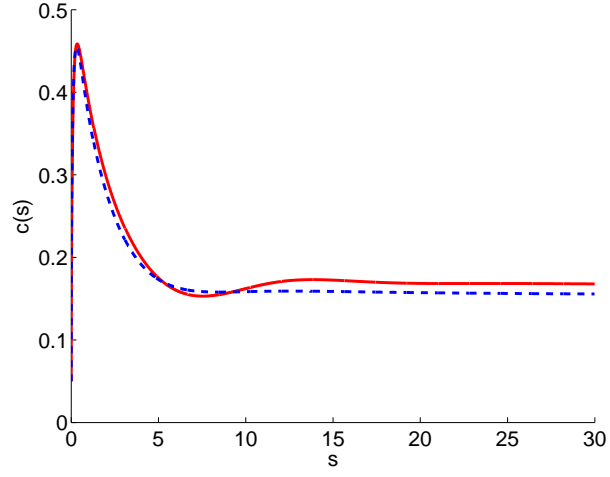


Figura 16:  $c$  calculada numéricamente a partir del sistema discreto (línea continua) y a partir de la ecuación (43) (línea discontinua). Usamos coeficiente de difusión (10).

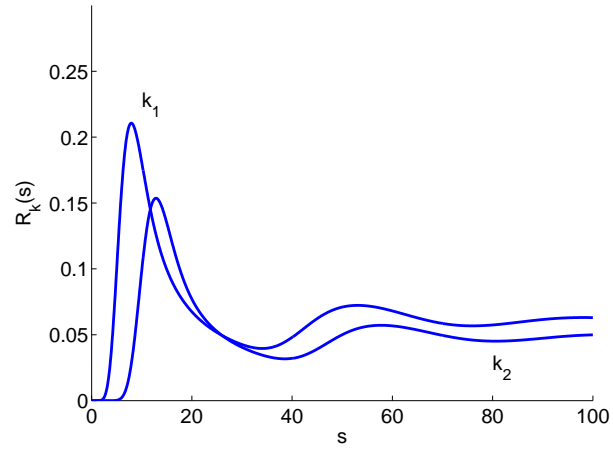


Figura 17: Aproximación de las funciones  $R_k$ , con coeficiente de difusión constante, para  $k_1 = 12$  y  $k_2 = 24$ .

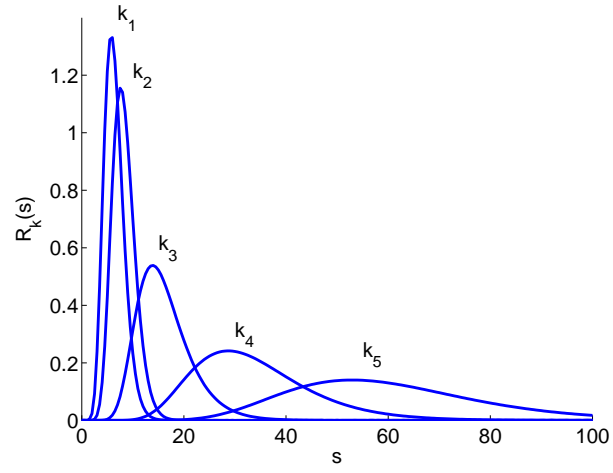


Figura 18: Aproximación de las funciones  $R_k$ , para  $k_1 = 12$ ,  $k_2 = 15$ ,  $k_3 = 18$ ,  $k_4 = 21$ ,  $k_5 = 24$  y con coeficiente de difusión (8).

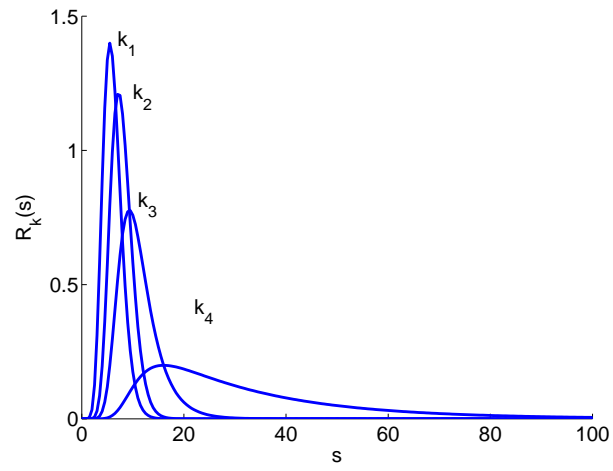


Figura 19: Aproximación de las funciones,  $R_k$ , para  $k_1 = 12$ ,  $k_2 = 15$ ,  $k_3 = 16$ ,  $k_4 = 17$  y con coeficiente de difusión (9).



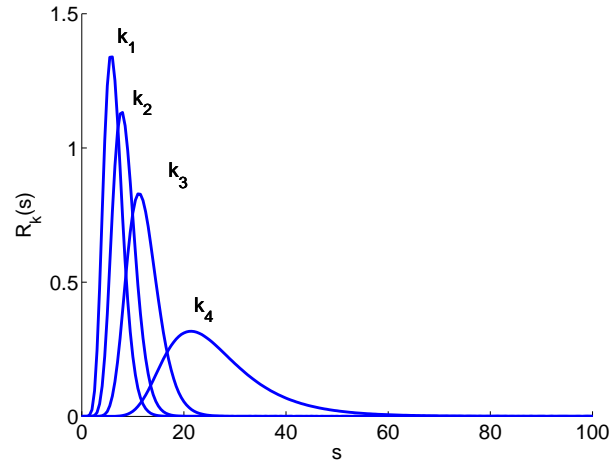


Figura 20: Aproximación de las funciones  $R_k$ , para  $k_1 = 12$ ,  $k_2 = 15$ ,  $k_3 = 18$ ,  $k_4 = 21$  y con coeficiente de difusión (10).

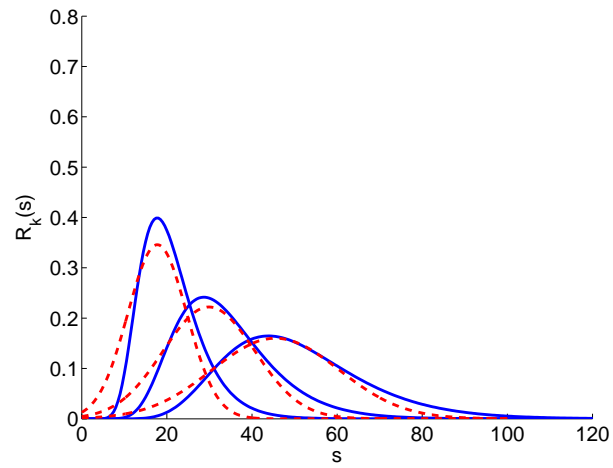


Figura 21: Aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y  $R_k$  exactas (línea continua), con coeficiente de difusión (8).

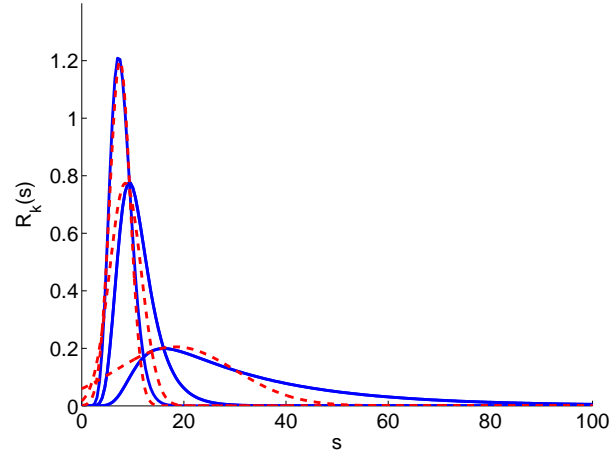


Figura 22: Aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y  $R_k$  exactas (línea continua), con coeficiente de difusión (9).

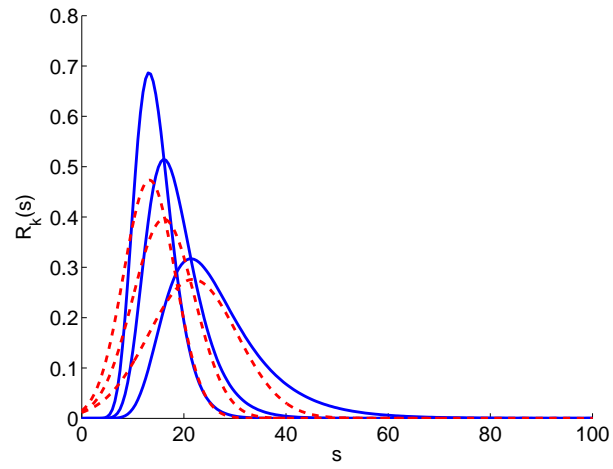


Figura 23: Aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y  $R_k$  exactas (línea continua), con coeficiente de difusión (10).

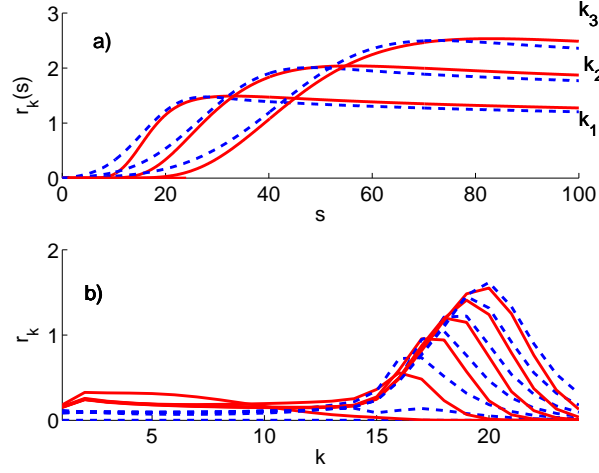


Figura 24: a) Soluciones  $r_k$ , para  $k_1 = 19$ ,  $k_2 = 21$ ,  $k_3 = 23$ , usando una aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y solución exacta (línea continua). b) Soluciones frente al tamaño de la burbuja, exactas (línea continua) y usando la aproximación gaussiana (línea discontinua). Todo con coeficiente de difusión (8).

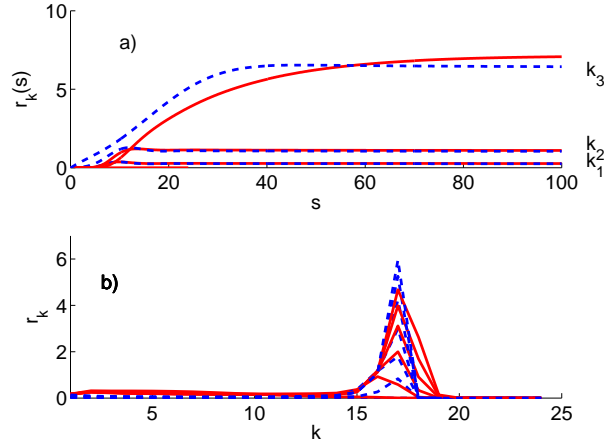


Figura 25: a) Soluciones  $r_k$ , para  $k_1 = 15$ ,  $k_2 = 16$ ,  $k_3 = 17$ , usando una aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y solución exacta (línea continua). b) Soluciones frente al tamaño de la burbuja, exactas (línea continua) y usando la aproximación gaussiana (línea discontinua). Todo con coeficiente de difusión (10).

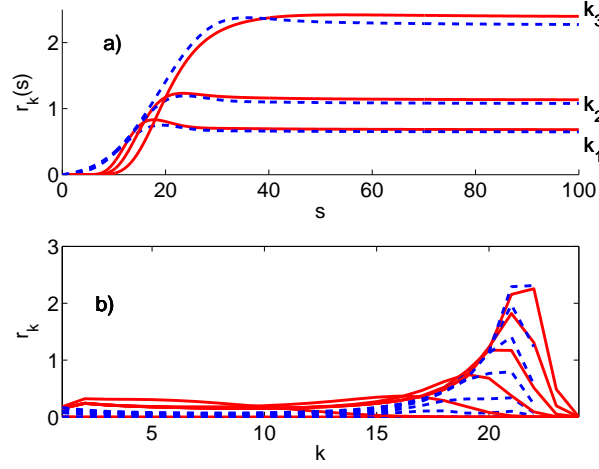


Figura 26: a) Soluciones  $r_k$ , para  $k_1 = 19$ ,  $k_2 = 20$ ,  $k_3 = 21$ , usando una aproximación gaussiana para las  $R_k$  (línea discontinua) y solución exacta (línea continua). b) Soluciones frente al tamaño de la burbuja, exactas (línea continua) y usando la aproximación gaussiana (línea discontinua). Todo con coeficiente de difusión (10).

#### 4. Existencia y unicidad de soluciones.

En esta sección trataremos de justificar la existencia y unicidad de solución de nuestro problema. Para ello podemos seguir dos estrategias:

- Reescribir el problema como un sistema de EDO's, derivando la ley de conservación para  $r_1$ .
- Recurrir a la formulación obtenida mediante transformadas de Laplace, para asegurar la existencia de una solución,  $c$ , de la ecuación integro-diferencial (43) y después obtener  $r_k$  mediante la fórmula (41).

En cualquiera de los casos se recurre a los resultados teóricos existentes, a cerca de solución de sistemas de ecuaciones diferenciales en espacios de dimensión infinita  $\ell^\infty$  o de solución de ecuaciones integro-diferenciales respectivamente.

Utilizaremos el sistema diferencial infinito para establecer existencia local. A continuación, la formulación integro-diferencial nos permite establecer la positividad de  $c$ , lo que garantiza que el cambio de variable de  $t$  a  $s$  está bien definido pues  $s$  es una función creciente de  $t$ . Finalmente, recurrimos al sistema diferencial en la variable  $s$  para establecer existencia global.

#### 4.1. Existencia local

Vamos a obtener en primer lugar un resultado de existencia y unicidad local en tiempo. Trabajando con la variable  $s$  tendríamos un problema lineal para  $r_k(s), k > 1$ , pero parte de datos iniciales singulares. Conviene recurrir a la formulación original en la variable  $t$ , que es no lineal. Una vez establecida la existencia local, podemos utilizar la formulación lineal en la variable  $s$  para garantizar existencia global.

El problema del que partíamos era:

$$\frac{dr_k}{dt} = (k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1) r_1 r_{k-1} - k^{\frac{1}{3}} D(k) r_1 r_k, k \geq 3, \quad (54)$$

$$\frac{dr_2}{dt} = 2D(1)r_1^2 - 2^{\frac{1}{3}} D(2) r_1 r_2, \quad (55)$$

$$r_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k r_k = \int_0^{\tilde{t}} g(t') dt' = t. \quad (56)$$

Derivando en función de  $t$ , la condición integral que da la última ecuación queda:

$$\frac{dr_1}{dt} = 1 - \sum_{k=2}^{\infty} k \frac{dr_k}{dt}, \quad (57)$$

e introduciendo en ella las ecuaciones (54) y (55) tenemos:

$$\frac{dr_1}{dt} = 1 - 4D(1)r_1 r_1 - \sum_{k=3}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k) r_1 r_k. \quad (58)$$

Podemos ahora, expresar de forma matricial nuestro sistema de infinitas ecuaciones diferenciales dadas por (54), (55) y (58) de manera que tenemos el siguiente problema de valor inicial:

$$Y' = F(t, Y)$$

$$Y(t_0) = Y_0$$

con  $Y = (r_1, \dots, r_k, \dots)^T$ ,  $t_0 = 0$ ,  $Y_0 = \bar{0}$  y  $F(t, Y) = r_1 A Y + G(t)$ , siendo:

$$A = \begin{pmatrix} -4D(1) & -2^{\frac{1}{3}} D(2) & -3^{\frac{1}{3}} D(3) & . & -k^{\frac{1}{3}} D(k) & . & . & . \\ 2D(1) & -2^{\frac{1}{3}} D(2) & 0 & . & 0 & . & . & . \\ 0 & 2^{\frac{1}{3}} D(2) & -3^{\frac{1}{3}} D(3) & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & 0 & . & . & . \\ 0 & . & 0 & (k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1) & -k^{\frac{1}{3}} D(k) & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \end{pmatrix},$$

y

$$G(t) = (1, 0, \dots, 0, \dots)^T.$$

Con el fin de asegurar la existencia y unicidad del problema anterior, tratamos de aplicar el siguiente teorema para espacios en dimensión infinita (véase [3]):

**Teorema:** Sea  $y_0 \in Y$ ,  $Y$  Banach, sea una bola cerrada en él,  $B$ , con centro en  $y_0 = 0$  y radio  $\rho \geq 0$  y sea  $f : [t_0, t_0 + \alpha] \times B \longrightarrow Y$  una función continua tal que:

- $\|f(t, Y)\| \leq M$  para todo  $(t, y) \in [t_0, t_0 + \alpha] \times B$ .
- $\|f(t, y) - f(t, z)\| \leq g(t, \|y - z\|)$  cuando  $(t, y), (t, z) \in (t_0, t_0 + \alpha] \times B$ , donde  $g$  satisface la propiedad 1, con  $\beta = 2\rho$ .

Entonces si  $\eta = \min(\alpha, \frac{\rho}{M})$ , el problema de valor inicial  $y' = f(t, y)$ ,  $y(t_0) = y_0$ , tiene solución única para  $t \in [t_0, t_0 + \eta]$ .

**Propiedad 1:**  $g : (t_0, t_0 + \alpha] \times [0, \beta] \longrightarrow [0, \infty)$  es una función continua que cumple:

- $g(t, 0) = 0$  para todo  $t \in (t_0, t_0 + \alpha]$ .
- Para cada  $t_1 \in (t_0, t_0 + \alpha]$ ,  $\chi = 0$  es la única solución de  $x' = g(t, x)$  en  $(t_0, t_1]$  tal que  $\chi(t_0+) = 0$  y que  $\lim_{t \rightarrow t_0+} \frac{\chi(t)}{t - t_0} = 0$ .

Volviendo a nuestro problema, comprobamos que se cumplen todas las hipótesis del teorema anterior:

1) *Continuidad:*

$F : [0, \alpha] \times B_{l^\infty}(\bar{0}, \rho) \longrightarrow l^\infty$ , es continua.

2) *Acotación:*

$$\begin{aligned} \|F(t, r_1, \dots, r_k, \dots)\| &= \sup (|1 - 4D(1)r_1^2(t) - \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)r_1(t)r_k(t)|, |2D(1)r_1^2(t) - \\ &2^{\frac{1}{3}} D(2)r_1(t)r_2(t)|, \dots, |(k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1)r_1(t)r_{k-1}(t) - k^{\frac{1}{3}} D(k)r_1(t)r_k(t)|, \dots) \leq \\ &\sup (1 + 4D(1)\|Y\|^2 + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)\|Y\|^2, (2D(1) + 2^{\frac{1}{3}} D(2))\|Y\|^2, \dots, ((k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1) + \\ &k^{\frac{1}{3}} D(k))\|Y\|^2, \dots) \leq 1 + C_0(D)\|Y\|^2 \leq 1 + C_0(D)\rho = M. \end{aligned}$$

3) *Condición de Lipschitz local:*

$$\begin{aligned} \|F(t, Y) - F(t, Z)\| &= \|F(t, r_1, \dots, r_k, \dots) - F(t, s_1, \dots, s_k, \dots)\| \leq \sup (4D(1)|r_1^2(t) - \\ &s_1^2(t)| + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)|, 2D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + 2^{\frac{1}{3}} D(2)|r_1(t)r_2(t) - \\ &s_1(t)s_2(t)|, \dots, (k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| + k^{\frac{1}{3}} D(k)|r_1(t)r_k(t) - \\ &s_1(t)s_k(t)|, \dots). \end{aligned}$$

Acotamos los tres tipos de términos por separado:

$$\begin{aligned} 4D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)| &= 4D(1)|r_1(t) + \\ s_1(t)||r_1(t) - s_1(t)| + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)|r_1(t)r_k(t) - r_k(t)s_1(t) + r_k(t)s_1(t) - s_1(t)s_k(t)| &\leq \\ C_1\rho\|Y - Z\| \end{aligned}$$

$$2D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + 2^{\frac{1}{3}}D(2)|r_1(t)r_2(t) - s_1(t)s_2(t)| = 2D(1)|r_1(t) + s_1(t)||r_1(t) - s_1(t)| + 2^{\frac{1}{3}}D(2)|r_1(t)r_2(t) - r_2(t)s_1(t) + r_2(t)s_1(t) - s_1(t)s_2(t)| \leq C_2\rho\|Y - Z\|$$

$$(k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| + k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)| = (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - r_{k-1}(t)s_1(t) + r_{k-1}(t)s_1(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| + k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - r_k(t)s_1(t) + r_k(t)s_1(t) - s_1(t)s_k(t)| \leq C_3\rho\|Y - Z\|$$

Llamando  $C = \max(C_1, C_2, C_3)$  y

$$G(t, \|Y - Z\|) = \rho C\|Y - Z\|,$$

tenemos que

$$\|F(t, Y) - F(t, Z)\| \leq G(t, \|Y - Z\|),$$

para todo,  $(t, Y), (t, Z) \in (0, \alpha) \times B_{l^\infty}(\bar{0}, \rho)$ . Además, la función  $G$  cumple la propiedad 1, con lo que podemos aplicar el teorema.

**Teorema 1.** *Existe una única solución del problema (54), (55), (56), con condiciones iniciales  $c(0) = 0$  y  $r_k(0) = 0, k \geq 2$ , definida hasta un tiempo  $\eta = \frac{\rho}{M}$ .*

## 4.2. Positividad

La ecuación (58) y el hecho de partir de datos iniciales nulos garantizan que  $c = r_1$  es positiva durante un cierto tiempo. Podemos definir el cambio de variable  $\frac{ds}{dt} = c(s)$  y  $s(t)$  es positiva y creciente durante ese tiempo. Esto nos permite reescribir el sistema (54), (55), (58) en función de la variable  $s$ , aplicar la transformada de Laplace como en la Sección 3.2. para obtener la ecuación integro-diferencial (43) para  $c$ . Esta ecuación nos garantiza que  $c$  no puede anularse para  $s$  positivo. Si  $c(s_0) = 0, s_0 > 0$ , entonces

$$\frac{dc}{ds}(s_0) + \int_0^{s_0} \sum_{k=2}^{\infty} R_k(s - s')c(s')ds = \frac{1}{c(s_0)} = \infty,$$

lo cual es imposible, ya que la integral en un intervalo finito de una función acotada es finita y la derivada en  $s_0$  también lo es. Por tanto,  $c$  es siempre positivo y  $s(t)$  es una función positiva y creciente. Como los núcleos  $R_k$  son positivos, (41) implica que  $r_k, k > 2$  son también positivas. Hemos probado que

**Teorema 2.** *La solución  $c = r_1$  de (43) que arranca de  $c(0) = 0$  y las funciones  $r_k$  definidas por (41) son positivas si los núcleos  $R_k$  son positivos y la serie  $\sum_{k=2}^{\infty} R_k$  es finita.*

Reescribiendo (43) en la variable  $t$  obtenemos

$$\frac{dc}{dt} + 4D(1)c^2 + 2D(1)c \int_0^t \left[ \sum_{k=2}^{\infty} R_k(s(t) - s(t')) \right] c^2(s(t')) dt' = 1, \quad (59)$$

$$\frac{ds}{dt} = c(t), \quad (60)$$

que se puede utilizar alternativamente para dar resultados de existencia para  $c$  (y consecuentemente, para  $r_k$ ). Basta reescribir (59) y (60) como:

$$U'(t) = F(t, U(t), z(t)), \quad (61)$$

$$z(t) = \int_0^t K(t, t', U(t')), \quad (62)$$

$$(63)$$

con condicion inicial

$$U(0) = \bar{0}, \quad (64)$$

donde

$$U(t) = (u_1, u_2) = (c(t), s(t)) \quad (65)$$

$$K(t, t', U(t')) = \sum_{k=2}^{\infty} R_k(u_2(t) - u_2(t'))u_1^2(t'), \quad (66)$$

$$F(t, U(t), z(t)) = (F_1, F_2) = (1 - 4D(1)u_1^2(t) + 2D(1)u_1(t)z(t), u_1(t)). \quad (67)$$

Integramos en (61) para conseguir:

$$U(t) = \int_0^t F(t', U(t'), z(t'))dt'$$

que unida a la ecuación (62) da lugar a la siguiente ecuación integral de Volterra:

$$V(t) = \int_0^t G(t, t', V(t'))dt', \quad (68)$$

$$V(t_0) = V_0, \quad (69)$$

donde,

$$V(t) = (u_1(t), u_2(t), z(t)), \quad (70)$$

$$G(t, t', V(t')) = (G_1, G_2, G_3) = (F_1(t, V), F_2(t, V), K(t, t', V),) \quad (71)$$

$$(72)$$

para después aplicar el siguiente teorema:(véase, [4])

**Teorema.** Sea el problema integral

$$x(t) = f(t) + \int_0^t g(t, t', x(t'))dt', t \in [t_0, t_0 + \alpha]$$

de manera que se satisfacen:

- 1)  $f$  es una aplicación continua de  $[t_0, t_0 + \alpha]$  en  $\mathbb{R}^n$ ;
- 2)  $g$  es una aplicación continua de  $\Delta \times B_r$ , donde  $\Delta = (t, t')/t_0 \leq t' \leq t_0 + \alpha$  y  $B_r$  la bola de centro  $\bar{0}$  y radio  $r$ ;
- 3)  $g(t, t', x)$  es localmente Lipschitz en la variable  $x$ ;



4) Si  $\beta = \sup_{t \in [t_0, t_0 + \alpha]} |f(t)|$ , entonces  $\beta < r$ .

Entonces el problema integral tiene solución única continua en un intervalo  $[t_0, t_0 + \delta]$ . Además esta solución es el límite uniforme de la sucesión de aproximaciones sucesivas.

En nuestro caso  $f(t) = 0$  así que las condiciones 1) y 4) se cumplen trivialmente. Además  $G(t, t', V(t'))$  es continua, luego se cumple 2). Por otro lado, sus derivadas parciales existen y son continuas con lo que es localmente Lipschitz, es decir, se cumple 3). Comprobado esto estamos en posición de enunciar el siguiente teorema:

**Teorema 3.** *La ecuación integro-diferencial (43) tiene solución única.*

Además, por el método de las aproximaciones sucesivas, si definimos la sucesión  $V_0 = 0$ ,  $V_m = \int_0^t G(t, t', V_{m-1}) dt'$ ,  $m \geq 1$  tenemos que  $V(t) = \lim_{m \rightarrow \infty} V_m(t)$ .

### 4.3. Existencia global

Una vez establecida la existencia local, la positividad de  $c$  y la corrección del cambio de variable  $s(t)$ , tomamos como nuevo dato inicial los valores  $r_k(\tau)$ ,  $k = 1, 2, \dots$  en un tiempo  $\tau$  en el que  $c(\tau) = r_1(\tau) \neq 0$ . Podemos entonces considerar un nuevo problema de valores iniciales en la variable  $s$ :

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{\frac{1}{3}} D(k-1)r_{k-1} - k^{\frac{1}{3}} D(k)r_k, k \geq 3, \quad (73)$$

$$\frac{dr_2}{ds} = 2D(1)r_1 - 2^{\frac{1}{3}} D(2)r_2, \quad (74)$$

$$\frac{dr_1}{ds} = \frac{1}{r_1} - 4D(1)r_1 - \sum_{k=3}^{\infty} k^{\frac{1}{3}} D(k)r_k, \quad (75)$$

Por la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias, sabemos que una solución local se puede extender hasta un tiempo maximal. Se tienen dos opciones, o ese tiempo maximal es infinito y tenemos existencia global, o es finito y la solución explota en el sentido de que alguna norma de la solución se hace infinito al acercarse a ese tiempo.

En la variable  $s$ , tenemos el siguiente problema de valor inicial:

$$Y' = F(s, Y)$$

$$Y(s_0) = Y_0$$

con  $Y = (r_1, \dots, r_k, \dots)^T$ ,  $Y_0 = Y(\tau)$  y  $F(s, Y) = AY + G(s)$ , siendo:

$$A = \begin{pmatrix} -4D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & \cdot & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1) & \cdot & \cdot & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix},$$

y

$$G(s) = \left( \frac{1}{r_1(s)}, 0, \dots, 0, \dots \right)^T.$$

Si  $G(s) = 0$ , tenemos un problema lineal en un Banach de dimensión infinita y la existencia de solución global está garantizada ([3]).

Cuando  $G(s) = \frac{1}{r_1}$ , el problema se puede reescribir como

$$Y(s) = S(s)Y(\tau) + \int_0^s S(s-s') \left( \frac{1}{r_1(s')}, 0, \dots, 0 \right)^T ds', \quad (76)$$

donde  $S(s)Z$  es la solución del problema lineal con dato inicial  $Z$  y  $G = 0$ . Supongamos por reducción al absurdo que  $Y(s) \rightarrow \infty$  cuando  $s \rightarrow s_1$ . Por las propiedades del operador  $S$  y la expresión integral (76), esto sólo puede ocurrir si la fuente  $\frac{1}{r_1(s)}$  tiende a infinito en tiempo finito y esto requiere que  $r_1$  se anule en tiempo infinito, lo que es imposible. Hemos probado que:

**Teorema 4.** *El sistema (54), (55), (58) con datos iniciales nulos tiene una única solución definida para todo  $t > 0$ .*

#### 4.4. Propiedades de los núcleos $R_k$ .

Por qué resultan ser positivos? Se ve numéricamente y es una hipótesis razonable.

Por qué se puede suponer que la serie  $\sum R_k$  es finita? También se ve numéricamente.

### 5. Tratamiento numérico.

Una vez asegurada la existencia y unicidad de la solución de nuestro problema, en esta sección trataremos las estrategias numéricas para atacar la ecuación integro-diferencial (43). Primero mostraremos los principales resultados teóricos al respecto y, posteriormente, discutiremos la efectividad de algunos esquemas concretos.

### 5.1. Resultados teóricos.

Consideremos la siguiente ecuación integro-diferencial de Volterra:

$$u'(t) = F(t, u(t), z(t)), \quad (77)$$

$$z(t) = \int_0^t K(t, s, u(s)) ds. \quad (78)$$

$$u(0) = u_0$$

Como hemos dicho, nuestro objetivo es aproximar la solución  $u(t)$  de (77) con  $0 \leq t \leq \alpha$  usando un esquema numérico. Para hacer esto, podemos seguir tres estrategias distintas: podemos combinar una fórmula de cuadratura lineal para aproximar  $z(t)$  y un método clásico para ecuaciones diferenciales ordinarias, podemos integrar la primera ecuación para tratar el problema como un sistema de ecuaciones integrales de manera que usaremos dos fórmulas de cuadratura lineal o, en los casos en los que  $K(t, s, u(s))$  tiene una expresión simple, podemos derivar la segunda ecuación para tratarlo como un sistema de ecuaciones diferenciales. En cualquiera de los casos, elegimos un paso fijo  $h$  y denotamos por  $N$  al número de pasos ( $Nh = \alpha$ ).

Para enfrentarnos a la ecuación dada por (61)-(67), hemos elegido la primera de las estrategias de modo que, si discretizamos, nos queda:

$$u'(t_i) = F(t_i, u(t_i), z(t_i)),$$

$$z(t_i) = \int_0^{t_i} K(t_i, s, u(s)) ds.$$

Aproximamos  $z(t_i)$  por la fórmula:

$$z_i = h \sum_{j=0}^i \omega_j^i K(t_i, t_j, u_j), \quad (79)$$

y, aplicando un método multipaso lineal de  $p$  pasos a (77), tenemos:

$$\sum_{n=0}^p \alpha_n u_{i+n} = h \sum_{n=0}^p \beta_n F_{i+n}, \quad (80)$$

where  $F_n = F(t_n, u_n, z_n)$ . Si aproximamos los  $p$  primeros valores usando un método monopaso adecuado obtenemos el método:

$$\sum_{n=0}^p \alpha_n u_{i+n} = h \sum_{n=0}^p \beta_n F(t_{i+n}, u_{i+n}, h \sum_{j=0}^{i+n} \omega_j^{i+n} K(t_{i+n}, t_j, u_j)). \quad (81)$$

P. Linz demuestra en [5] que, para asegurar la convergencia de un método de la forma (81), es suficiente exigir los criterios clásicos acerca de 0-estabilidad

y consistencia.

**Definición.** Un método de la forma method of the form (81) se dice que es *estable* si todas las raíces del polinomio

$$\rho(z) = \sum_{n=0}^p \alpha_n z^n$$

en el interior del círculo unidad o en su frontera,  $|z| \leq 1$ , y las raíces de módulo uno son simples.

También consideraremos el polinomio

$$\sigma(z) = \sum_{n=0}^p \beta_n z^n$$

pudiendo definir así el siguiente concepto:

**Definición.** Decimos que un método de la forma (81) es *consistente* si:

- (i)  $\rho(1) = 0$ ,
- (ii)  $\rho'(1) = \sigma(1)$ ,
- (iii) los pesos de la fórmula de cuadratura  $\omega_j^i$  son acotados,  $|\omega_j^i| \leq W$ , para cada  $i$  y todo  $j \leq i$ , y son tales que para cualquier función continua  $f(x)$ ,

$$\int_0^t f(s) ds - h \sum_{j=0}^i \omega_j^i f(t_j) \longrightarrow 0,$$

donde  $h \rightarrow 0$ ,  $i \rightarrow \infty$  y  $hi = t$ .

**Definición.** Un método de la forma (81) se dice que es *convergente* si

$$|e_i| = |u(t_i) - u_i| \longrightarrow 0,$$

cuando  $h \rightarrow 0$ ,  $i \rightarrow \infty$  y  $hi = t$ .

Para probar el siguiente teorema necesitamos recurrir a dos lemas previos que podemos encontrar en [5]. El primero consiste en un lema de acotación, lo que es habitual en esta clase de métodos. El segundo nos garantiza que la definición anterior de consistencia implica que el error de truncatura tiende a cero.

**Teorema.** Un método consistente y estable de la forma (81) es convergente.

Por otro lado, in [6], W.L. Mokarsky muestra resultados análogos a los de Linz, pero abordando el problema con la segunda estrategia, esto es, aplicando dos fórmulas de cuadratura lineal al problema integral:

$$u_i = \sum_{j=0}^i \nu_j^i F(t_i, u_j, h \sum_{k=0}^j \omega_k^j K(t_j, t_k, u_k)) + u_0. \quad (82)$$

**Definición.** Un método de la forma (82) se dice que es *consistente* si para cualquier función  $f$  continua en  $[0, \xi]$  se cumple:

$$\left| \int_0^\xi f(s)ds - h \sum_{j=0}^i \omega_j^i f(t_j) \right| \longrightarrow 0,$$

$$\left| \int_0^\xi f(s)ds - h \sum_{j=0}^i \nu_j^i f(t_j) \right| \longrightarrow 0,$$

cuando  $h \rightarrow 0$ ,  $i \rightarrow \infty$  y  $hi = \xi$ .

Usando una vez más un lema de acotación, podemos probar el siguiente teorema:

**Teorema.** Cualquier método consistente de la forma (82) es también convergente.

## 5.2. Esquemas numéricos.

Como vimos en las figuras 14, 15 y 16 de la sección 3.3 para obtener una buena aproximación de la concentración de monómeros, basta con tomar como  $R_k$  en forma de función delta. Usando esta expresión hemos realizado distintos esquemas numéricos basándonos en las estrategias descritas en el punto anterior. A la hora de elegir un método numérico para resolver un problema, además de asegurar la convergencia del método utilizado, así como conocer el orden de ésta, es muy importante tener en cuenta la estabilidad de dicho método aplicado a nuestro problema concreto. Así, debido a la rigidez del problema podemos encontrarnos con que un método de orden menor nos proporciona mejores resultados, incluso usando un paso de mayor tamaño. Es por esto que hemos llevado a cabo pruebas a tiempos largos con las distintas opciones, para poder concluir que método nos proporciona mejores resultados con menor coste computacional.

Por un lado hemos utilizado métodos que combinan una fórmula de cuadratura lineal con un método clásico para sistemas de EDO's. En concreto hemos diseñado dos esquemas de orden 2, ambos usan la fórmula del trapecio compuesto para aproximar la integral y uno la combina con el Método de Euler y otro con un Runge-Kutta de orden dos. También hemos tratado el problema con dos métodos de orden cuatro, usando para la integral el método de Simpson compuesto junto con un Runge-Kutta de orden 4 en un caso y con un multipaso de orden cuatro en el otro.

Por otro lado hemos diseñado esquemas siguiendo la segunda estrategia expuesta en la sección 5.1, es decir, convirtiendo el problema en uno integral y aplicando dos fórmulas de cuadratura. Los dos diseños en este caso se basan en utilizar o bien la fórmula del trapecio (orden dos), o bien la de Simpson (orden cuatro). Después de comparar los resultados obtenidos en cada uno de los casos, podemos concluir que el que mejor resultados nos ofrece es precisamente el primero, Euler con Trapecio. Obtenemos con él muy buena aproximación utilizando un

paso de tamaño mayor que en los otros casos, lo que nos lleva a menor tiempo de ejecución

## References

- [1] C.M. SCHALDACH, W.G. WOLFER, *Kinetics of Helium bubble formation in nuclear and structural materials*, in *Effects of Radiation Materials:21st Symposium*. M.L. GROSSBECK; T.R. ALLEN; R.G. LOTT; A.S. KUMAR, eds ASTM STP 1447, ASTM International, West Conshohocken.
- [2] L.L. BONILLA, A. CARPIO, J.C. NEU, W.G. WOLFER, *Kinetics of helium bubble formation in nuclear materials*, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 222, 131-140, 2006
- [3] A. CARPIO, B. TAPIADOR, *Analysis of helium bubble growth in radioactive waste*, *Journal of Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 11, 4174-4184, 2010
- [4] T.M. FLETT, *Differential Analysis*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1980.
- [5] C.CORDUNEANU, *Integral Equations and Applications*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1991.
- [6] P. LINZ, *Linear multistep methods for Volterra integro-differential equations*, *J. Assoc. Comput. Mach.*, 16 (1969), pp. 295-301.
- [7] W.L. MOKARSKY, *Convergence of step-by-step methods for nonlinear integro-differential equations*, *J. Inst. Math. Appl.* 8, 235(1971).